

$\text{Si}(\text{CH}_2\text{Cl})\text{H}_3$

1958

5932

$\text{CH}_3\text{SiH}_2\text{CH}_3$, $\text{CH}_3\text{SiH}_2\text{F}$, $\text{CH}_3\text{SiH}_2\text{Cl}$,
 $\text{CH}_3\text{SiH}_2\text{Br}$, $\text{CH}_3\text{SiH}_2\text{I}$, $\text{CH}_3\text{SiH}_2\text{NC}$, $(\text{CH}_3\text{SiH}_2)_2\text{O}$,
 $(\text{CH}_3\text{SiH}_2)_2\text{S}$, $(\text{CH}_3\text{SiH}_2)_3\text{N}$ ()

Ebsworth E.A.V., Onyszchuk M.,
 Sheppard N.

J. Chem. Soc., 1958, Apr., 1453-60
 Infrared spectrum...

J

S4CCEH5

CH₂ClSiH₃

12 В281. Микроволновый спектр, структура, константы квадрупольного взаимодействия и барьер внутреннего вращения хлорметилсилана. Sch w e n d e m a n R. H., Jacobs G. D. Microwave spectrum, structure, quadrupole coupling constants, and barrier to internal rotation of chloromethylsilane. «J. Chem. Phys.», 1962, 36, № 5. 1251—1257 (англ.)

В области 18—32 кМгц наблюдались микроволн. спектры изотопич. разновидностей молекулы CH₂ClSiH₃ в основном колебательном состоянии и первом возбужденном состоянии крутильных колебаний. По изменению моментов инерции при изотопич. замещениях найдены параметры структуры: длины связей (в Å) C—Cl 1,788; C—Si 1,899; C—H 1,096; Si—H 1,477 и углы SiCCl 109,3°; SiCH 109,3°; HSiH 110,6°; HCH 107,5°. Из сверхтонкой структуры спектра определены константы квадрупольной связи $eQq(\text{Cl}^{35}) = -68,7 \text{ Мгц}$ и $\eta = 0,048$ в случае, если главная ось квадрупольного тензора направлена вдоль связи CCl, и $eQq = -72,0 \text{ Мгц}$ в случае акспальной симметрии тензора. Барьер внутреннего вращения группы SiH₃ равен $2,55 \pm 0,05 \text{ ккал/моль}$. Г. Шипуло

ф. 1962. 128

$\text{CH}_2\text{ClSiH}_3$

5 Б133. Микроволновый спектр, константы квадрупольного взаимодействия и барьер внутреннего вращения в хлорметилсилане. Schwendeman R. H., Jacobs G. D. Microwave spectrum, structure, quadrupole coupling constants, and barrier to internal rotation of chloromethylsilane «J. Chem. Phys.», 1962, 36, № 5, 1251—1257 (англ.)

С помощью спектрометра с штарковской модуляцией в диапазоне 18,5—31,3 кМгц исследован спектр $\text{CH}_2\text{Cl}^{35}\text{SiH}_3$ (I); $\text{CH}_2\text{Cl}^{37}\text{SiH}_3$ (II); $\text{C}^{13}\text{H}_2\text{Cl}^{35}\text{SiH}_3$ (III); $\text{CH}_2\text{ClSi}^{29}\text{H}_3$ (IV); $\text{CD}_2\text{Cl}^{35}\text{SiH}_3$ (V); $\text{CHDCl}^{35}\text{SiH}_3$ (VI); $\text{CH}_2\text{Cl}^{35}\text{SiD}_3$ (VII). Большинство наблюдаемых переходов являлось параллельными переходами R-ветви с $K_{-1}=0 \rightarrow 1$, $J=3 \rightarrow 4$; $4 \rightarrow 5$ или перпендикулярными переходами Q-ветви с $K_{-1}=0 \rightarrow 1$, $J=6 \rightarrow 12$. Для параллельных переходов мультиплетная структура в большинстве случаев не была разрешена, перпендикулярные переходы представляли собой две пары хорошо разрешенных линий. Определены моменты инерции молекул в основном колебательном состоянии (в ат. ед.

1962

М-0809-сбв

X. 1963. 5

сч. к/об

массы $\times A^2$): I 23,2330; 157,7772; 172,0612; II 23,3040;
 161,7625; 176,1187; III 23,9811; 157,7630; 172,8033; IV
 23,2676; 160,2109; 174,5299; V 29,2506; 159,3445; 176,4996;
 VI, 26,2600; 158,4349; 174,4149; VII 28,8280; 172,7738;
 186,7144. Для I, V и VII найдены также моменты инер-
 ции в первом возбужденном состоянии крутильных ко-
 лебаний. Методом изотопного замещения определена
 структура молекул $d_{\text{SiC}} 1,889 \pm 0,01$; $d_{\text{CCl}} 1,788 \pm 0,01$;
 $d_{\text{CH}} 1,096 \pm 0,01$; $d_{\text{SiH}} 1,477 \pm 0,005$ А; $\angle \text{SiCCl } 109,3^\circ \pm$
 $\pm 0,3^\circ$; $\angle \text{HSiH } 110,6^\circ \pm 0,5^\circ$; $\angle \text{HCH } 107,5^\circ \pm 0,5^\circ$; $\angle \text{SiCH}$
 $109,3^\circ \pm 0,5^\circ$. По сверхтонкой структуре переходов Q-
 ветви в I найдено $eQq = -32,51 \pm 0,56$ Мгц; $\eta = 1,215 \pm$
 $\pm 0,021$. Отсюда для связи C—Cl χ (связи) = $-68,7$ Мгц,
 η (связи) = $0,048$, если предположить, что направление
 связи C—Cl совпадает с одной из главных осей тен-
 зора квадрупольного взаимодействия или χ (связи) =
 $-72,0$ Мгц, если предположить η (связи) = 0 . Полу-
 ченные значения отвечают 19—22% ионного характера
 связи C—Cl. По сателлитам линий I в возбужденном
 состоянии крутильных колебаний определена высота
 барьера внутреннего вращения $V_3 = 2,55 \pm 0,05$ ккал/
 /моль. Это на $0,9$ ккал/моль больше барьера в метилси-
 лане, что сравнимо с различием высот барьеров в эта-
 не и его изотопном замещенном.

Т. Бирштейн

1961

CH₂ClSiH₃

14729 MICROWAVE SPECTRUM, STRUCTURE, QUADRUPOLE COUPLING CONSTANTS, AND BARRIER TO INTERNAL ROTATION OF CHLOROMETHYLSILANE.

R. H. Schwendeman (Harvard Univ., Cambridge, Mass.) and G. D. Jacobs. J. Chem. Phys., 36: 1251-7 (Mar. 1, 1962).

Observations of the microwave spectra of seven ground-state species and three first excited torsional state species of CH₂ClSiH₃ are reported. From an analysis of the moments of inertia of the various species structural parameters are deduced as follows: bond distances; CCl = 1.788, CSi = 1.889, CH = 1.096, SiH = 1.477 Å, and bond angles; SiCCl = 109.3, SiCH = 109.3, HSiH = 110.6, and HCH = 107.5°. An analysis of the hyperfine splitting leads to

B926080-117

NSA · 1962 · 16 · 12a

quadrupole coupling parameters $\chi_{\text{CCl bond}} = -68.7 \text{ Mc}$, $\eta_{\text{CCl bond}} = 0.048$, if it is assumed that the CCl bond direction forms one principal axis of the quadrupole tensor; and $\chi_{\text{CCl bond}} = -72.0 \text{ Mc}$ if it is assumed that the quadrupole tensor is cylindrically symmetric. Analysis of splittings in the first excited torsional state indicate that the height of the potential barrier hindering internal rotation of the SiH_3 group is 2.55 kcal/mole. (auth)

11962

11-0800-103

Microwave spectrum, structure, quadrupole coupling constants, and barrier to internal rotation of chloromethylsilane. R. H. Schwendeman and G. D. Jacobs (Michigan State Univ., East Lansing). *J. Chem. Phys.* 36, 1251-7 (1962). Observations of the microwave spectra of 7 ground-state species and 3 1st-excited-torsional-state species were reported. The following structural parameters were detd.: $d(\text{C-Cl}) = 1.788 \text{ \AA.}$, $d(\text{C-Si}) = 1.889 \text{ \AA.}$, $d(\text{C-H}) = 1.096 \text{ \AA.}$, $d(\text{Si-H}) = 1.477 \text{ \AA.}$, $\angle \text{Si-C-Cl} = 109.3^\circ$, $\angle \text{Si-C-H} = 109.3^\circ$, $\angle \text{H-Si-H} = 110.6^\circ$, and $\angle \text{H-C-H} = 107.5^\circ$. An analysis of the hyperfine splitting led to quadrupole coupling parameters $\chi_{\text{CCl}} = -68.7 \text{ Mc./sec.}$ and $\eta_{\text{CCl}} = 0.048$; if it is assumed that the C-Cl bond direction forms 1 principal axis of the quadrupole tensor; and $\chi_{\text{CCl}} = -72.0 \text{ Mc./sec.}$ if it is assumed that the quadrupole tensor is cylindrically sym. Analysis of splittings in the 1st excited torsional state yielded a height of the potential barrier hindering internal rotation of the SiH_3 group of 2.55 kcal./mole.

Henry Leidheiser, Jr.

C.A. 1962. 57. 2
1765i-1766a

$\text{Si-Cl-CH}_2\text{H}_3$
spiky/3

$\text{SiH}_3\text{CH}_2\text{Cl}$

BP - M1519-IV | 1966

Lowe J. P.; Parr R. C.

(V₀)

"J. Chem. Phys.",
1966, 44 (8), 3001-9.

1972

5 Д418. Отнесение колебаний и силовые постоянные галогенометилсиланов и их германиевых аналогов: $\text{ClCH}_2\text{SiH}_3$, $\text{ClCH}_2\text{SiD}_3$, $\text{BrCH}_2\text{SiH}_3$, $\text{BrCH}_2\text{SiD}_3$, $\text{ClCH}_2\text{GeH}_3$ и $\text{ClCH}_2\text{GeD}_3$. Отно Keiichi, Murata Higo mu. The vibrational assignment and force constants of halogenomethylsilanes and their germanium analogues: $\text{ClCH}_2\text{SiH}_3$, $\text{ClCH}_2\text{SiD}_3$, $\text{BrCH}_2\text{SiH}_3$, $\text{BrCH}_2\text{SiD}_3$, $\text{ClCH}_2\text{GeH}_3$, and $\text{ClCH}_2\text{GeD}_3$. «Bull. Chem. Soc. Jap.», 1972, 45, № 11, 3333—3342 (англ.)

Исследованы ИК-спектры ($4000\text{--}250\text{ см}^{-1}$) XCH_2YH_3 и XCH_2YD_3 , где $\text{X}=\text{Cl}$ и Br , $\text{Y}=\text{Si}$ и Ge , в газообразном и твердом состояниях. Дано отнесение всех основных колебаний, за исключением деф. кол. скелета и крутильных колебаний YH_3 . Проведен расчет норм. колебаний молекул с использованием модифицированного силового поля Юри — Брэдли. Обсуждается возможность использования силовых постоянных ряда молекул XH_3 , CH_3YH_3 и $\text{XCH}_2\text{CH}_2\text{X}$ для расчета исследованных молекул. Приведены таблицы измеренных и рассчитанных частот с их отнесением и наборы силовых постоянных. Библ. 13.

Э. В. Б.

+2

X

 ClCH_2
 SiH_3

с.п.; в.

Ф. 1973 № 5

ClCH₂SiH₃

1972

(Vib. r.n.) 22082r Vibrational assignment and force constants of halo-methylsilanes and their germanium analogs. (Chloromethyl)silane, (chloromethyl)silane-d₃, (bromomethyl)silane, (bromomethyl)silane-d₃, (chloromethyl)germane, and (chloromethyl)germane-d₃. Ohno, Keiichi; Murata, Hiromu (Fac. Sci., Hiroshima Univ., Hiroshima, Japan). *Bull. Chem. Soc. Jap.* 1972, 45(11), 3333-42 (Eng). The ir spectra of ClCH₂SiH₃, ClCH₂SiD₃, BrCH₂SiH₃, BrCH₂SiD₃, ClCH₂GeH₃, and ClCH₂GeD₃ for both the gaseous and solid states at 250-4000 cm⁻¹ were obtained. All the fundamental vibrations except for the skeletal bending and YH₃(-D₃) (Y = Si, Ge) torsional vibrations were obsd. and assigned. The normal vibration calcn. was carried out by using a modified Urey-Bradley force field. The transferability of the force const. was also investigated.

C. A. 1973. 78. N4

(+4) ☒

$\text{ClCH}_2\text{SiD}_3$

1972

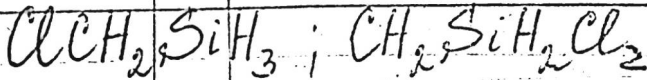
K. Ohno, Murata H.

Vic. n.

Bull. Chem. Soc. Jap., 1972,
45, 3333-42.

● $(\text{C}_6\text{H}_5\text{CH}_2\text{SiH}_3)_{\text{III}}$

1975



18 Б200. Молекулярные колебания и поворотная изомерия в хлор(хлорметил)силане. Soga Keiichi. The molecular vibrations and rotational isomerism of chloro(chloromethyl)silane. «Bull. Chem. Soc. Jap.», 1975, 48, № 2, 649—656 (англ.)

(V_i)
Измерены ИК-спектры $\text{ClCH}_2\text{SiH}_2\text{Cl}$ (I) и $\text{ClCH}_2\text{SiD}_2\text{Cl}$ в газообразном, жидк. и кристаллич. состояниях, а также спектр КР I в жидк. состоянии в области 50—3000 cm^{-1} . В газе и жидк. состоянии I существует в двух изомеров (транс- и гош-) за счет вращения вокруг связи C—Si. В кристалле сохраняется только один изомер. Проведено отнесение частот обоих изомеров, используя правило произведений, расчет частот скелетных колебаний, анализ контуров полос в газовой фазе и сравнение со спектрами $\text{ClCH}_2\text{SiH}_3$ и $\text{CH}_2\text{SiH}_2\text{Cl}$. Зависимость спектров от р-рителя указывает, что гош-форма является более полярной. В кристалле I существует в виде транс-изомера.

Б. В. Локшин

X 1975 N 18

$\text{H}_3\text{SiCH}_2\text{Cl}$

[INT. 5156]

1977

Schmidbauer M., et al.

(analog)
92. C634

Z. Naturforsch.; 32b, 1977,
481-4.

CH₃ Si H₂ ll (OM-36501) 1980

Leil W., Christen D.,

7, < J. Phys. Chem., 1980,
84, 1790-1792.